



Balance de Masa

con y sin reacción Química

Guía de Ejercicios

Elaborado por:
Narciso Pérez Santodomingo
NAPEREZ@USB.VE



BIBLIOGRAFÍA

- D. M. Himmelblan. **Principios y cálculos básicos de la ingeniería química.**
- Hougen-Watson-Ragatz. **Principios de los procesos químicos.**
- R. Felder - R. Rousseau. **Principios elementales de los procesos químicos.**
- Henley - Rosen. **Cálculos de balances de materia y energía.**
- E. I. Shahenn. **Basic practice of chemical engineerins.**



PARTE 1. PROBLEMAS RESUELTOS

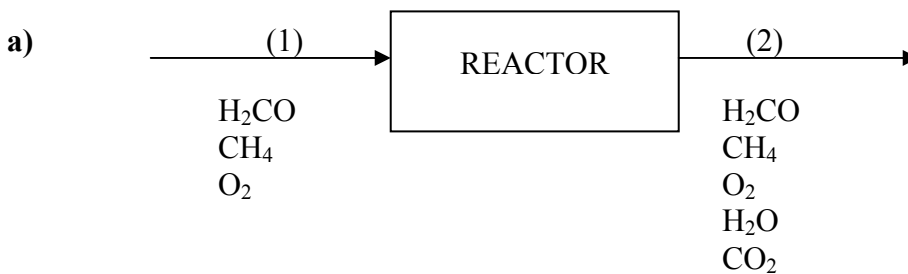
1. Se produce metanal (H_2CO) mediante reacción catalítica del metano con oxígeno, obteniéndose también agua. El metano combustiona parcialmente formando dióxido de carbono y agua.

Se alimenta un 100% de exceso de O_2 a un reactor catalítico para producción de metanal. La corriente de alimentación contiene 1% molar de metanal, además de los reactivos. En estas condiciones, se obtiene una conversión fraccional del metano del 0.9 y una selectividad de 10 moles de metanal producidos por mol de dióxido producido.

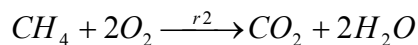
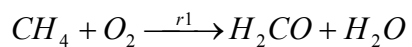
a) Calcule las composiciones molares a la salida del reactor y el rendimiento fraccional a metanal (moles producidos / moles producibles).

b) Suponga que la corriente de salida del reactor se alimenta a un separador donde se separa en dos corrientes: una contiene toda el agua y el 90% del metanal y la otra contiene los gases y el resto del metanal. Calcule la composición del metanal en ambas corrientes.

RESOLUCIÓN



Reacciones:





DATOS Y RELACIONES AUXILIARES

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|--|--|
| (a) Se alimenta un 100% de exceso de O ₂ a un reactor catalítico | $\%exc^{O_2} = (N^{O_2}_1 - CTR^{O_2}) * 100 / CTR^{O_2} = 100$ |
| (b) La corriente de alimentación contiene 1% molar de metanal | $X^{H_2CO}_1 = 0,01$ |
| (c) Se obtiene una conversión fraccional del metano del 0,9 | $Conv^{CH_4} = (N^{CH_4}_1 - N^{CH_4}_2) / N^{CH_4}_1 = 0,9$ ó $(r_1 + r_2) / N^{CH_4}_1 = 0,9$ |
| (d) Se obtiene una selectividad de 10 moles de metanal producidos por mol de dióxido producido | $S_{H_2CO/CO_2} = r_1 / r_2 = 10$ ó $(N^{H_2CO}_2 - N^{H_2CO}_1) / N^{CO_2}_2 = 10$ |

RESULTADOS PEDIDOS

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|---|---|
| Composiciones molares a la salida del reactor | $X^{H_2CO}_2, X^{CH_4}_2, X^{O_2}_2, X^{H_2O}_2, X^{CO_2}_2$ |
| Rendimiento fraccional a metanal | $Rend = (N^{H_2CO}_2 - N^{H_2CO}_1) / N^{CH_4}_1$ ó $(r_1) / N^{CH_4}_1$ |

GRADOS DE LIBERTAD

| | REACTOR |
|-----------------------|----------------------|
| Variables del sistema | 8+2 |
| Balances L. I. | 5 |
| Flujos | 0 |
| Composiciones | 1 ^(b) |
| Relaciones auxiliares | 3 ^(a,c,d) |
| Grados de Libertad | 1 |



ESTRATEGIA PRELIMINAR DE RESOLUCIÓN

Para el análisis de los grados de libertad no se realiza un análisis para el proceso ni para el global debido a que como el proceso consta de un único equipo, estos dos análisis son iguales al del reactor solamente.

Luego de obtener los grados de libertad del reactor se tiene por resultado que estos son iguales a 1 y como no existen datos de flujo en el problema, es necesario establecer una base de cálculo que permita la resolución del problema. Hay que tomar en cuenta que al asumir una base las propiedades extensivas cambian y las intensivas no, como por ejemplo las composiciones, por lo que estableciendo cualquier base se obtienen los mismos resultados en cuanto a composición se refiere.

Solución:

Luego de analizar en donde se debe establecer una base de cálculo, se obtiene que por conveniencia se establece la cantidad de moles de metano en la corriente 1.

Base:

$$N^{CH_4}_1 = 100 \text{ mol} / h$$

Para poder obtener las relaciones de reacción de ambas reacciones se hace uso de las relaciones auxiliares suministrados, para r_1 :

$$Conv^{CH_4} = \left(\frac{N^{CH_4}_1 - N^{CH_4}_2}{N^{CH_4}_1} \right)$$

Sabiendo que:

$$r_1 = N^{CH_4}_1 - N^{CH_4}_2$$

Se obtiene que:

$$Conv = \frac{r_1}{N^{CH_4}_1}$$

Y que:



$$r_1 = \text{Conv} \times N^{\text{CH}_4}_1 = 0,9 \times 100 \text{ mol/h}$$

$$r_1 = 90 \text{ mol/h}$$

Para r_2 , se hace uso de otra relación auxiliar:

$$S_{\text{H}_2\text{CO}/\text{CO}_2} = \frac{N^{\text{H}_2\text{CO}}_{\text{producidos}}}{N^{\text{CO}_2}_{\text{producidos}}} = \frac{r_1}{r_2}$$

Por lo tanto:

$$r_2 = \frac{r_1}{S_{\text{H}_2\text{CO}/\text{CO}_2}} = \frac{90 \text{ mol/h}}{10}$$

$$r_2 = 9 \text{ mol/h}$$

Ahora para poder conocer la cantidad que se alimenta en 1 es necesario conocer la cantidad de O_2 y la de H_2CO , para la de O_2 se tiene otra relación suministrada:

$$\%exc^{O_2} = \frac{N^{O_2}_1 - CTR_{O_2}}{CTR_{O_2}} \times 100\%$$

Primero se necesita la cantidad teórica requerida de O_2 para que se consuma todo el metano alimentado por la reacción principal (1), que se obtiene como:

$$CTR_{O_2} = N^{\text{CH}_4}_1 \times \frac{\sigma_1^{O_2}}{\sigma_1^{\text{CH}_4}} = 100 \text{ mol/h} \times \frac{1}{1}$$

$$CTR_{O_2} = 100 \text{ mol/h}$$

Se calculan luego los moles de O_2 alimentados:

$$N^{O_2}_1 = \frac{\%exc^{O_2}}{100\%} \times CTR^{O_2} + CTR^{O_2} = \frac{100\%}{100\%} \times 100 \text{ mol/h} + 100 \text{ mol/h} = 200 \text{ mol/h}$$

Se sabe que:

$$X^{\text{CH}_4}_1 + X^{O_2}_1 + X^{\text{H}_2\text{CO}}_1 = 1$$

y se tiene que:



$$X^{CH_4}_1 + X^{O_2}_1 = 1 - X^{H_2CO}_1 = 1 - 0,01$$

$$X^{CH_4}_1 + X^{O_2}_1 = 0,99$$

Si se considera que lo que se conoce son las cantidades molares de ambos componentes, se debe escribir esta relación de la forma:

$$\frac{N^{CH_4}_1}{N_1} + \frac{N^{O_2}_1}{N_1} = 0,99$$

Si se despeja N_1 :

$$N_1 = \frac{N^{CH_4}_1 + N^{O_2}_1}{0,99} = \frac{200\text{mol/h} + 100\text{mol/h}}{0,99}$$

$$N_1 = 303,03\text{mol/h}$$

Y los moles de metanal son:

$$N^{H_2CO}_1 = X^{H_2CO}_1 \times N_1 = 0,01 \times 303,03\text{mol/h}$$

$$N^{H_2CO}_1 = 3,03\text{mol/h}$$

Ahora se puede calcular cada uno de los flujos de los componentes en 2, mediante los balances por componentes en el sistema del reactor, los cuales tienen la forma

$$S = E + P - C,$$

si es un proceso estacionario con reacción química.

Para el metano:

$$N^{CH_4}_2 = N^{CH_4}_1 - r_1 - r_2$$

$$N^{CH_4}_2 = 100\text{mol/h} - 90\text{mol/h} - 9\text{mol/h}$$

$$N^{CH_4}_2 = 1\text{mol/h}$$

Para el oxígeno:



$$N^{O_2}_2 = N^{O_2}_1 - r_1 - 2r_2 = 200\text{mol/h} - 90\text{mol/h} - 2 \times 9\text{mol/h}$$

$$N^{O_2}_2 = 92\text{mol/h}$$

Para el metanal:

$$N^{H_2CO}_2 = N^{H_2CO}_1 + r_1 = 3.03\text{mol/h} + 90\text{mol/h}$$

$$N^{H_2CO}_2 = 93,03\text{mol/h}$$

Para el dióxido de carbono:

$$N^{CO_2}_2 = r_2 = 9\text{mol/h}$$

Para el agua:

$$N^{H_2O}_2 = r_1 + 2 \times r_2 = 90\text{mol/h} + 2 \times 9\text{mol/h}$$

$$N^{H_2O}_2 = 108\text{mol/h}$$

Y los moles totales son:

$$N_2 = N^{CH_4}_2 + N^{O_2}_2 + N^{H_2CO}_2 + N^{CO_2}_2 + N^{H_2O}_2$$

$$N_2 = 303,03\text{mol/h}$$

Para el cálculo de las fracciones:

$$X^{CH_4}_2 = \frac{N^{CH_4}_2}{N_2}; \quad X^{O_2}_2 = \frac{N^{O_2}_2}{N_2}$$

$$X^{H_2CO}_2 = \frac{N^{H_2CO}_2}{N_2}; \quad X^{CO_2}_2 = \frac{N^{CO_2}_2}{N_2}$$

$$X^{H_2O}_2 = \frac{N^{H_2O}_2}{N_2}$$



Y el resultado:

$$X^{CH_4} = 0,003;$$

$$X^{O_2} = 0,304;$$

$$X^{H_2CO} = 0,307;$$

$$X^{CO_2} = 0,029;$$

$$X^{H_2O} = 0,356$$

Para calcular el rendimiento fraccionario, se sabe que los moles producibles son:

$$r'_1 = N^{CH_4} = 100 \text{ mol/h},$$

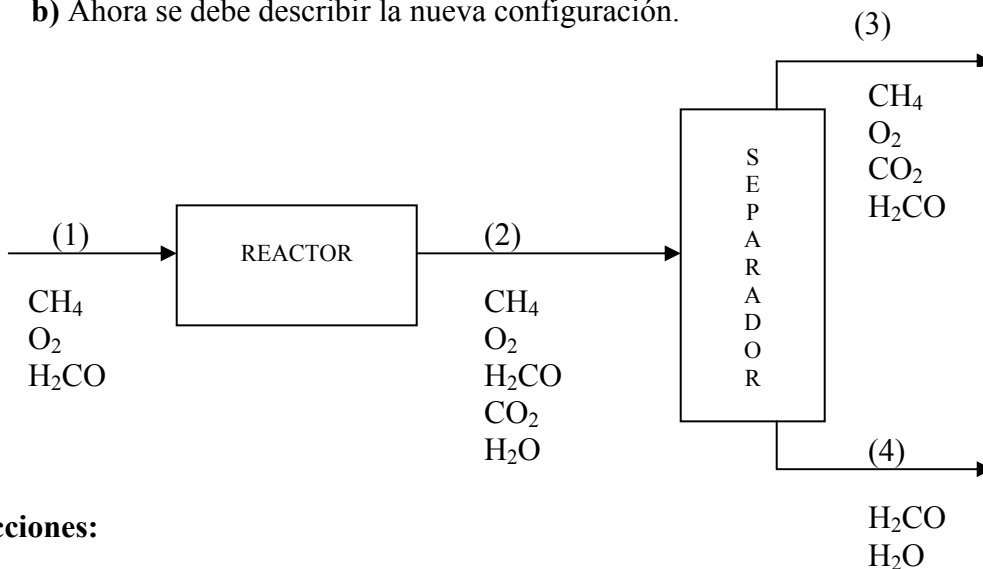
puesto que la máxima cantidad teóricamente producible de metanal es la que se obtendría si todo el metano alimentado al reactor reaccionara y solamente ocurriera la reacción de producción de metanal.

Y el rendimiento fraccional es:

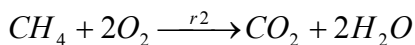
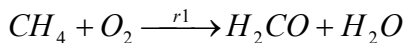
$$\text{Rend} = \frac{r_1}{r'_1} = \frac{90 \text{ mol/h}}{100 \text{ mol/h}}$$

Rend = 0,9

b) Ahora se debe describir la nueva configuración.



Reacciones:





DATOS Y RELACIONES AUXILIARES

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|--|--|
| (a) Se alimenta un 100% de exceso de O ₂ a un reactor catalítico | $\%exc^{O_2} = (N^{O_2}_1 - CTR^{O_2}) * 100 / CTR^{O_2} = 100$ |
| (b) La corriente de alimentación contiene 1% molar de metanal | $X^{H_2CO}_1 = 0,01$ |
| (c) Se obtiene una conversión fraccional del metano del 0,9 | $Conv^{CH_4} = (N^{CH_4}_1 - N^{CH_4}_2) / N^{CH_4}_1 = 0,9$ ó $(r_1 + r_2) / N^{CH_4}_1 = 0,9$ |
| (d) Se obtiene una selectividad de 10 moles de metanal producidos por mol de dióxido producido | $S_{H_2CO/CO_2} = r_1 / r_2 = 10$ ó $(N^{H_2CO}_2 - N^{H_2CO}_1) / N^{CO_2}_2 = 10$ |
| (e) La corriente líquida contiene 90% del metanal que ingresó al separador | $N^{H_2CO}_4 = 0,9 N^{H_2CO}_2$ |

RESULTADOS PEDIDOS

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|--|----------------------------|
| Composiciones molares de metanal a la salida del separador | $X^{H_2CO}_3, X^{H_2CO}_4$ |

GRADOS DE LIBERTAD

| | REACTOR | SEPARADOR | PROCESO | GLOBAL |
|------------------------------|----------------------|------------------|------------------------|------------------|
| Variables del sistema | 8+2 | 11 | 14+2 | 9+2 |
| Balances L. I. | 5 | 5 | 10 | 5 |
| Flujos | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Composiciones | 1 ^(b) | 0 | 1 ^(b) | 1 ^(b) |
| Relaciones auxiliares | 3 ^(a,c,d) | 1 ^(e) | 4 ^(a,c,d,e) | 1 ^(a) |
| Grados de Libertad | 1 | 5 | 1 | 4 |



ESTRATEGIA PRELIMINAR DE RESOLUCIÓN

El análisis de grados de libertad del proceso al igual que en la sección a, da 1; lo que implica que es necesario aplicar la misma procedimiento que en la parte a, resolviendo el reactor con lo que se obtienen los 5 datos necesarios para hacer cero los grados de libertad del separador, con lo que queda resuelto este balance y el problema.

Solución:

Luego de haber resuelto la parte a, y tomando como datos iniciales los resultados obtenidos del balance en el reactor, se procede a realizar el balance en el separador.

Para el metano:

$$N^{CH_4}_3 = N^{CH_4}_2 = 1 \text{ mol} / h$$

Para el oxígeno:

$$N^{O_2}_3 = N^{O_2}_2 = 92 \text{ mol} / h$$

Para el dióxido de carbono:

$$N^{CO_2}_3 = N^{CO_2}_2 = 9 \text{ mol} / h$$

Para el agua:

$$N^{H_2O}_3 = N^{H_2O}_2 = 108 \text{ mol} / h$$

Y para el metanal:

Haciendo uso del dato suministrado:

$$N^{H_2CO}_4 = 0,9N^{H_2CO}_2 = 0,9 \times 93,03 \text{ mol} / h$$

$$N^{H_2CO}_4 = 83,72 \text{ mol} / h$$

Y a partir de este:



$$N^{H_2CO_2} = N^{H_2CO_4} + N^{H_2CO_3} \Rightarrow N^{H_2CO_3} = N^{H_2CO_2} - N^{H_2CO_4}$$

$$N^{H_2CO_3} = 93,03 \text{ mol/h} - 83,72 \text{ mol/h}$$

$$N^{H_2CO_3} = 9,31 \text{ mol/h}$$

Para la corriente 3:

$$N_3 = N^{CH_4}_3 + N^{O_2}_3 + N^{CO_2}_3 + N^{H_2CO_3}$$

$$N_3 = 111,31 \text{ mol/h}$$

y la fracción molar de metanal en la corriente gaseosa (3) es:

$$Y^{H_2CO_3} = \frac{N^{H_2CO_3}}{N_3}$$

$$Y^{H_2CO_3} = \mathbf{0,084}$$

Para la corriente 4:

$$N_4 = N^{H_2O}_4 + N^{H_2CO}_4$$

$$N_4 = 191,72 \text{ mol/h}$$

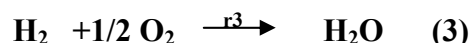
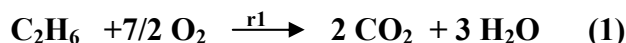
y la fracción molar de metanal en la corriente líquida (4) es:

$$X^{H_2CO}_4 = \frac{N^{H_2CO}_4}{N_4}$$

$$X^{H_2CO}_4 = \mathbf{0,437}$$



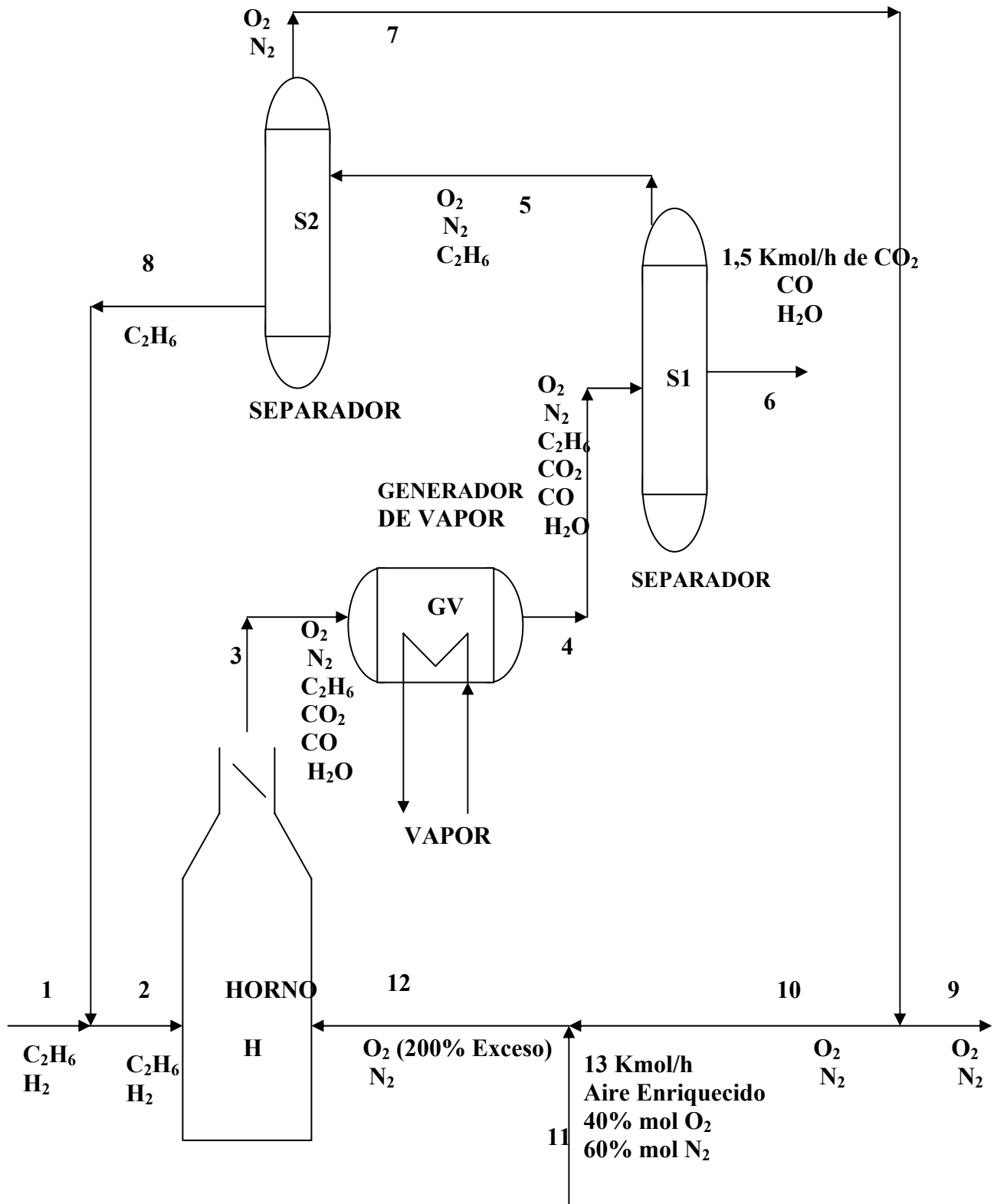
2. En la sección de combustión de una planta de producción de CO₂ se emplea como materia prima una corriente (1) de combustible, que contiene C₂H₆ y H₂. Esta corriente se mezcla con otra de recirculación (8) que contiene sólo etano. La corriente resultante (2) es la alimentación de combustible al horno (H). Los gases que salen del horno (corriente 3) son enviados a un generador de vapor (GV) donde se enfrían. Estos gases fríos (corriente 4) alimentan a un separador (S1), del que se obtienen dos corrientes: una que es la corriente de producto (6) que tiene CO, H₂O, y 1,5 kmol/h de CO₂, y la otra es la corriente de tope (5) que contiene C₂H₆, O₂ y N₂. Esta última corriente alimenta a un separador (S2) de cuyo fondo sale la corriente de recirculación (8), y del tope sale otra corriente de recirculación (7) que es una mezcla de O₂ y N₂. Con el propósito de evitar la acumulación de Nitrógeno en el proceso, es necesario eliminar una parte de la corriente 7, lo que origina una corriente de purga (9). El flujo restante de la corriente 7 (corriente 10) se mezcla con un flujo de 13 Kmol/h de aire enriquecido limpio y seco que contiene 40 % mol de O₂ (corriente 11). La corriente resultante es el aire que entra al horno (corriente 12), en la que hay un 200 % de exceso de O₂. Este porcentaje de exceso garantiza un 80 % de conversión de etano y un 100% de conversión de hidrógeno (ambas en una sola etapa). De todo el etano convertido en el proceso, el 80% se transforma en CO₂ y el resto en CO. Por la corriente de purga (9) se pierde el 40 % del oxígeno alimentado en la corriente (11). Las reacciones de combustión son:



- Determine la composición molar (en %) de la corriente de purga (corriente 9).
- Determine la composición molar (en %) y el flujo molar (en Kmol /h) de la corriente de combustible que entra al proceso (corriente 1).
- Determine la composición molar (en %) y el flujo molar (en Kmol/h) de la corriente de aire enriquecido que entra al horno (corriente 12).
- Determine la composición molar (en %) sobre una base seca, para la corriente de gases de combustión (corriente 3).



DIAGRAMA DEL PROCESO





DATOS Y RELACIONES AUXILIARES

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|---|---|
| (a) Se tienen 1,5 Kmol/h de CO ₂ en 6 | $N^{CO_2}_6 = 1,5 \text{ Kmol/h}$ |
| (b) Se alimentan 13 Kmol/h de aire seco y limpio por 11 | $N_{11} = 13 \text{ Kmol/h}$ |
| (c) La composición de oxígeno en 11 es 40% mol | $X^{O_2}_{11} = 0,4 \text{ ó } X^{N_2}_{11} = 0,6$ |
| (d) Hay un 200 % de exceso de O ₂ en 12 | $\%exc^{O_2}_{12} = (N^{O_2}_{12} - CTR^{O_2}) * 100 / CTR^{O_2} = 200$ |
| (e) El % de conversión por paso en el horno de C ₂ H ₆ es 80% | $\%Conv^{C_2H_6} = (N^{C_2H_6}_2 - N^{C_2H_6}_3) * 100 / N^{C_2H_6}_2 = 80$ ó $Conv^{C_2H_6} = (r_1 + r_2) / N^{C_2H_6}_2 = 0,8$ |
| (f) El % de conversión de H ₂ por paso en el horno es 100% | $\%Conv^{H_2} = (N^{H_2}_2 - N^{H_2}_3) * 100 / N^{H_2}_2 = 100 \text{ ó}$ $Conv^{H_2} = r_3 / N^{H_2}_2 = 1,00$ |
| (g) De todo el etano convertido en el proceso, el 80% se transforma en CO ₂ y el resto en CO | $N^{CO_2}_3 = 0,8 * (N^{C_2H_6}_2 - N^{C_2H_6}_3) \text{ ó}$ $N^{CO}_3 = 0,2 * (N^{C_2H_6}_2 - N^{C_2H_6}_3)$ |
| (h) Por la corriente de purga (9) se pierde el 40% del oxígeno alimentado en la corriente (11) | $N^{O_2}_9 = 0,4 N^{O_2}_{11}$ |
| (i) Restricciones del punto de división | $(C-1)(r-1) = (2-1)(2-1) = 1$ $X^{O_2}_9 = X^{O_2}_{10} (*)$ |

(*) NOTA: En este caso existe una sola relación auxiliar implícita en el punto de división, correspondiente a una igualdad de composiciones entre cualesquiera dos corrientes y para cualquiera de los dos componentes. De forma arbitraria se tomó al O₂ y a las corrientes 9 y 10.

RESULTADOS PEDIDOS

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|---|---------------------------|
| Composición molar (en %) de la corriente de purga (corriente 9). | $X^{O_2}_9, X^{N_2}_9$ |
| Composición molar (en %) de la corriente de combustible que entra al proceso (corriente 1). | $X^{C_2H_6}_1, X^{H_2}_1$ |



| | |
|---|--|
| Flujo molar de la corriente de combustible que entra al proceso (corriente 1) | $N_1 = N_1^{C_2H_6} + N_1^{H_2}$ |
| Composición molar (en %) de la corriente de aire enriquecido que entra al horno (corriente 12). | $X_{12}^{O_2}, X_{12}^{N_2}$ |
| Flujo molar (en Kmol/h) de la corriente de aire enriquecido que entra al horno (corriente 12). | $N_{12} = N_{12}^{O_2} + N_{12}^{N_2}$ |
| Composición molar (en %) sobre una base seca, para la corriente de gases de combustión (corriente 3). | $N_3^{SECOS} = N_3^{O_2} + N_3^{N_2} + N_3^{C_2H_6} + N_3^{CO_2} + N_3^{CO}$ $X_3^{O_2} = N_3^{O_2} / N_3^{SECOS}$ $X_3^{N_2} = N_3^{N_2} / N_3^{SECOS}$ $X_3^{C_2H_6} = N_3^{C_2H_6} / N_3^{SECOS}$ $X_3^{CO_2} = N_3^{CO_2} / N_3^{SECOS}$ $X_3^{CO} = N_3^{CO} / N_3^{SECOS}$ |

ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

| Unidad | H | GV | S1 | S2 | M 1,2,8 | M 12,10,11 | D 7,9,10 | Proceso | Global |
|------------------------------|----------------------|----|------------------|----|------------|------------------|------------------|--|--------------------|
| Variables del sistema | 10+3 | 12 | 12 | 6 | 5 | 6 | 6 | 33+3 | 9+3 |
| Balances L. I. | 7 | 6 | 6 | 3 | 2 | 2 | 2 | 28 | 7 |
| Flujos | 0 | 0 | 1 ^(a) | 0 | 0 | 1 ^(b) | 0 | 2 ^(a,b) | 2 ^(a,b) |
| Composiciones | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 ^(c) | 0 | 1 ^(c) | 1 ^(c) |
| Relaciones auxiliares | 3 ^(d,e,g) | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 ⁽ⁱ⁾ | 4 ^(d,e,g,h) +1 ⁽ⁱ⁾ | 2 ^(g,h) |
| Grados de Libertad | 3 | 6 | 5 | 3 | 3 | 2 | 3 | 0 | 0 |

ESTRATEGIA PRELIMINAR DE RESOLUCIÓN

Del análisis de los grados de libertad tenemos que se debe resolver el balance global por ser el que tiene cero grados de libertad; pero al hacer esto no se obtienen datos suficientes para llevar a cero otro de los restantes sistemas, por lo cual es necesario evaluar los subsistemas conformados por 2 o más equipos como un solo sistema.



De esta manera se obtiene que después de resolver el balance global, el número de grados de libertad para el sistema constituido por: el horno (H), el generador de vapor(GV) y el separador (S1), es el siguiente:

| Unidad | Sistema |
|------------------------------|---------|
| Variables del sistema | 10+3 |
| Balances L. I. | 7 |
| Flujos | 3 |
| Composiciones | 0 |
| Relaciones auxiliares | 3 |
| Grados de Libertad | 0 |

Con lo que se obtienen las corriente 2, 5 y 12 que proveen los datos faltantes para hacer cero los grados de libertad del Horno, a partir de aquí se obtienen los 6 grados de libertad de GV y luego con este los de S2; quedando por resolver M1, el punto de división y M2 en este orden.

RESOLUCIÓN

Balace de N₂ en el proceso global:

$$N_{11}^{N_2} = N_9^{N_2} = 7,8 \text{ Kmol/h.}$$

Por dato del problema tenemos:

$$N_9^{O_2} = 0,4 * N_{11}^{O_2} = 2,08 \text{ Kmol /h.}$$

$$N_9 = N_9^{O_2} + N_9^{N_2}$$

$$N_9 = 9,88 \text{ Kmol / h.}$$

Con lo que podemos hallar las fracciones molares de la corriente 9.

$$X_9^{O_2} = X_7^{O_2} = X_{10}^{O_2} = 0,2105$$

$$X_9^{N_2} = X_7^{N_2} = X_9^{O_2} = 0,7895$$

Por lo que la respuesta a la pregunta **a)** es:

a) 21,05 % de O₂ (molar).

78,95 % de N₂ (molar).

A partir del balance de masa en CO₂, realizado en S1, en GV y en el horno, tenemos que:

$$N_6^{CO_2} = N_4^{CO_2} = N_3^{CO_2} = 1,5 \text{ Kmol /h} = N_{\text{prod}}^{CO_2} = 2 r_1$$



Donde r_1 son los moles de etano consumidos por la reacción (1), o lo que es lo mismo la relación de reacción.

Por dato del problema tenemos que la conversión de etano es igual a 80%, lo que es igual a:

$$\% \text{ conver } C_2H_6 = \frac{N_{\text{reacc}}^{C_2H_6}}{N_2^{C_2H_6}} * 100 = 80$$

Como los moles que reaccionan de C_2H_6 se da por dos reacciones tenemos que son iguales a:

$$N_{\text{reacc.}}^{C_2H_6} = r_1 + r_2 .$$

Por dato del problema tenemos que el consumo de etano se da en una relación del 80% por lo que:

$$r_1 / (r_1 + r_2) = 0,8$$

Con lo que $r_2 = 0,1875 \text{ Kmol / h}$

$$N_2^{C_2H_6} = (r_1 + r_2) / 0,8 = 1,1719 \text{ Kmol / h}$$

$$CTR_{O_2} = 1,1719 \text{ Kmol } C_2H_6 / \text{h} * \frac{7/2 \text{ Kmol } _{O_2}}{\text{Kmol } C_2H_6} + r_3 \frac{0,5 \text{ kmol } _{O_2}}{\text{Kmol } H_2}$$

Para poder obtener r_3 hacemos un balance por elementos global.

Para el oxígeno atómico (O) tenemos:

$$N_{11}^O = N_6^O + N_9^O$$

Donde:

$$N_{11}^O = 2N_{11}^{O_2}$$

$$N_9^O = 2N_9^{O_2} \quad \text{y}$$

$$N_6^O = 2N_6^{CO_2} + N_6^{H_2O} + N_6^{CO} = (4r_1) + (3r_1 + 3r_2 + r_3) + (2r_2)$$

Por lo que podemos decir:

$$2 N_{11}^{O_2} = 2 N_9^{O_2} + 2 N_6^{CO_2} + N_6^{H_2O} + N_6^{CO}$$



Que es lo mismo a:

$$2 N_{11}^{O_2} = 2 N_9^{O_2} + 4 r_1 + 3(r_1 + r_2) + r_3 + 2r_2$$

Despejando r_3 tenemos:

$$r_3 = 0,0525 \text{ Kmol / h.}$$

Por lo que la CTR $O_2 = 4,1279 \text{ Kmol / h.}$

Y el % en exceso es:

$$\% \text{ Exceso } O_2 = (N_{12}^{O_2} - \text{CTR } O_2) / \text{CTR } O_2 * 100 = 200$$

Por lo que podemos despejar los moles de oxígeno molecular (O_2) en la corriente 12

$$N_{12}^{O_2} = 12,3837 \text{ Kmol / h}$$

Si hacemos balance de materia de las corriente 10 y 11 en oxígeno (O_2) tenemos:

$$N_{10}^{O_2} = N_{12}^{O_2} - N_{11}^{O_2} = 7,1837 \text{ Kmol / h.}$$

Si hacemos balance en la corriente 7 en O_2 tenemos:

$$N_7^{O_2} = N_9^{O_2} + N_{10}^{O_2} = 9,264 \text{ Kmol / h.}$$

Como sabemos que la composición de la corriente 9 es igual a la de la corriente 7 calculamos los moles de la corriente 7:

$$N_7 = 9,264 \text{ Kmol / h.} / 0,2105$$

$$N_7 = 44 \text{ Kmol / h.}$$

Por dato del Problema tenemos que:

$$\% \text{ Conv } H_2 = 100 = (r_3 / N_2^{H_2}) * 100$$

Que despejando los moles de hidrógeno alimentado en 2 tenemos:

$$N_2^{H_2} = 0,0525 \text{ Kmol / h.}$$

$$N_2^{H_2} = N_1^{H_2}$$

Haciendo balance de etano en el horno tenemos:

$$r_1 + r_2 = N_2^{C_2H_6} - N_3^{C_2H_6}$$



Por lo que los moles a la salida del horno de etano es igual a:

$$N_3^{C_2H_6} = 0,2344 \text{ Kmol / h.}$$

Por balances de masa en C_2H_6 realizados en GV, S1 y S2:

$$N_3^{C_2H_6} = N_4^{C_2H_6} = N_5^{C_2H_6} = N_8^{C_2H_6}$$

Realizando balance en etano en el punto de mezcla 1 y 8 tenemos:

$$N_1^{C_2H_6} = N_2^{C_2H_6} - N_8^{C_2H_6}$$
$$N_1^{C_2H_6} = 0,9375 \text{ Kmol / h.}$$

Datos con los cuales podemos resolver la pregunta **b)**:

b) $N_1 = 0,99 \text{ Kmol / h.}$

$X_1^{C_2H_6} = 0,947$

$X_1^{H_2} = 0,053.$

Balance de N_2 en el punto de división de 7

$$N_{10}^{N_2} = N_7^{N_2} - N_9^{N_2} = 26,94 \text{ Kmol / h.}$$

Balance de N_2 en la mezcla de 10 con 11

$$N_{10}^{N_2} + N_{11}^{N_2} = N_{12}^{N_2}$$
$$N_{12}^{N_2} = 34,74 \text{ Kmol / h}$$

Datos con los cuales resolvemos la pregunta **c)**:

c) $N_{12} = 47,12 \text{ Kmol / h.}$

$X_{12}^{N_2} = 0,737.$

$X_{12}^{O_2} = 0,263$

Con lo cual hacemos balance por componentes en el horno

$$N_3^{O_2} = N_{12}^{O_2} - N_{\text{cons.}}^{O_2}$$

$$N_3^{O_2} = 9,254 \text{ Kmol / h}$$

$$N_3^{N_2} = N_{12}^{N_2}$$

$$N_3^{N_2} = 34,727 \text{ Kmol / h}$$



$$N_3^{C_2H_6} = N_2^{C_2H_6} - r_1 - r_2$$

$$N_3^{C_2H_6} = 0,2344 \text{ Kmol / h}$$

$$N_3^{CO_2} = 1,5 \text{ Kmol / h}$$

$$N_3^{CO} = 0,375 \text{ Kmol / h}$$

Y la composición en base seca de la corriente 3 es:

d) $X_3^{O_2}$ = moles de O_2 en 3 / moles totales en la corriente 3 menos los de agua.

$$X_3^{O_2} = 0,2$$

$X_3^{N_2}$ = moles de N_2 en 3 / moles totales en la corriente 3 menos los de agua.

$$X_3^{N_2} = 0,753$$

$X_3^{C_2H_6}$ = moles de C_2H_6 en 3 / moles totales en la corriente 3 menos los de agua.

$$X_3^{C_2H_6} = 0,005$$

$X_3^{CO_2}$ = moles de CO_2 en 3 / moles totales en la corriente 3 menos los de agua.

$$X_3^{CO_2} = 0,033$$

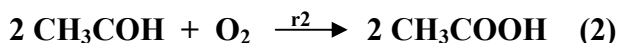
X_3^{CO} = moles de CO en 3 / moles totales en la corriente 3 menos los de agua

$$X_3^{CO} = 0,009$$



Parte 2. PROBLEMAS ANALIZADOS

4. El ácido acético se puede obtener mediante la fermentación aeróbica a partir de alcohol etílico, empleándose en este proceso un agente bacteriano que promueve la reacción. Las reacciones involucradas en el proceso son las siguientes:



El esquema de producción se muestra en la figura adjunta. La alimentación fresca del proceso (corriente 1) está constituida por una mezcla de alcohol etílico y agua al 80 % en peso de alcohol y hay 10 Kg. de bacterias por cada Kgmol de alcohol. Al reactor aeróbico ingresa una corriente de aire limpio y seco con un 90 % de exceso de O_2 , basado en la transformación completa del alcohol en la alimentación fresca a ácido acético (reacciones 1 y 2). En este reactor existe un rendimiento del 50 % de ácido acético basándose en el alcohol alimentado al equipo. Para asegurar la operación óptima de este reactor, se necesita mantener a la entrada de éste una relación de 0,5 Kg de alcohol por Kg de bacterias.

La corriente de producto del reactor se envía a una sección de purificación de la que se obtiene una corriente de desecho de bacterias (corriente 13); este desecho contiene una composición en peso de agua igual al 10 %. La corriente de producto final (corriente 7) es una mezcla al 60 % en peso de ácido acético. Los reactivos que quedan sin reaccionar son recirculados en parte al reactor y otra cantidad (corriente 8) es purgada del proceso. En todo el proceso se pierden 50 Kg de bacterias por Kgmol de alcohol etílico perdido.

1. Completa la tabla de balance de masa de este proceso (por Kgmol de alcohol alimentado al proceso) indicando los flujos de cada componente en cada corriente en Kgmol/ s o en su defecto, en Kg /s.
2. Calcule la selectividad de ácido acético a acetaldehído. Interprete su resultado en términos de producción.
3. Calcule el nuevo porcentaje de exceso de aire si se desea producir la misma cantidad de ácido acético pero empleando una corriente de aire enriquecido (50 % molar de O_2 y 50 % molar de N_2), obteniéndose una composición molar de N_2 a la salida del reactor de 70 %.



DIAGRAMA DEL PROCESO

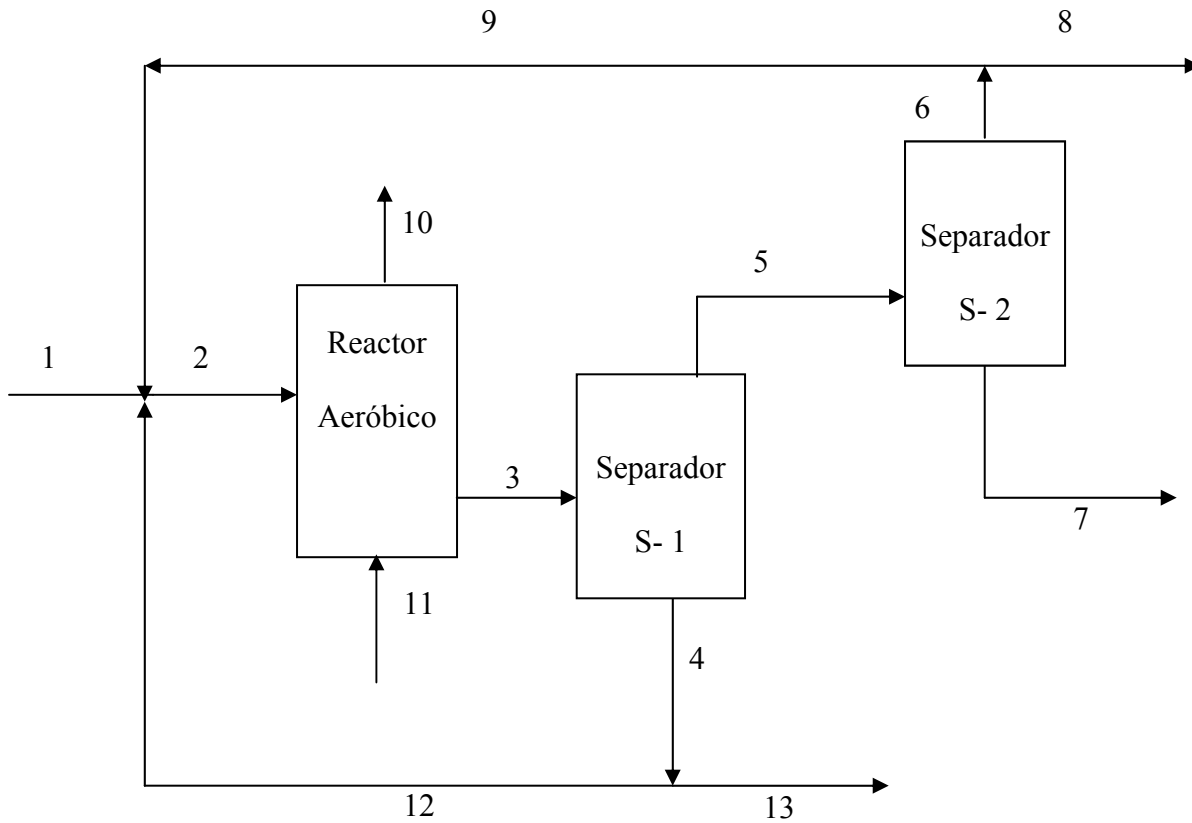


Tabla de Corrientes

| Sustancia | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|----------------------------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|----|
| C ₂ H ₅ OH | | | | X | | | x | | | x | x | x | x |
| O ₂ | x | x | x | X | X | x | x | x | x | | | x | x |
| N ₂ | x | x | x | X | X | x | x | x | x | | | x | x |
| Bacteria | | | | | X | x | x | x | x | x | x | | |
| H ₂ O | | | | | | x | | x | x | x | x | | |
| CH ₃ COH | x | | | X | | | x | | | x | x | x | x |
| CH ₃ COOH | x | x | | X | | x | | x | x | x | x | x | x |
| Total | | | | | | | | | | | | | |



DATOS Y RELACIONES AUXILIARES

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|--|---|
| (a) La alimentación fresca está constituida por una mezcla de alcohol etílico y agua al 80 % en peso de alcohol | $F^{Alc}_1/F^{H2O}_1=80/20$ |
| (b) Hay 10 Kg. de bacterias por cada Kgmol de alcohol en la corriente 1 | $F^{bacterias}_1/N^{alc}_1 = 10 \text{ (Kg/Kmol)}$ |
| (c) Al reactor ingresa una corriente de aire con un 90 % de exceso basado en la transformación completa del alcohol en la alimentación fresca a ácido acético (reacciones 1 y 2) | $\%exc^{O2} = (N^{O2}_1 - CTR^{O2}) * 100 / CTR^{O2} = 90$ |
| (d) Hay un rendimiento del 50% de ácido acético basándose en el alcohol alimentado al reactor | $\%Rend^{Acd\ acet} = 2 * r_2 * 100 / N^{Alc}_2 = 50$ ó $Rend^{Acd\ acet} = N^{Acd\ acet}_3 - N^{Acd\ acet}_2 / N^{Alc}_2 = 0,50$ |
| (e) Se necesita mantener a la entrada del reactor una relación de 0,5 Kg de alcohol por Kg de bacterias | $F^{alc}_2/F^{bact}_2 = 0,5$ |
| (f) Se obtiene una corriente de desecho de bacterias (corriente 13); este desecho contiene una composición en peso de agua igual al 10 %. | $W^{H2O}_{13} = 0,1; W^{Bact}_{13} = 0,9$ |
| (g) La corriente de producto final (corriente 7) es una mezcla al 60 % en peso de ácido acético | $W^{acd\ acet}_7 = 0,6; W^{H2O}_7 = 0,4$ |
| (h) En todo el proceso se pierden 50 Kg de bacterias por Kgmol de alcohol etílico perdido | $F^{bact}_{13}/N^{alc}_8 = 50 \text{ (Kg/Kmol)}$ |
| (i) Al reactor aeróbico ingresa una corriente de aire limpio y seco (Corriente 11) | $X^{N2}_{11} = 0,79; X^{O2}_{11} = 0,21$ |
| (j) Completa la tabla de balance de masa de este proceso (por Kgmol de alcohol alimentado al proceso) | $N^{Alc}_1 = 1 \text{ Kmol}$ |



| | |
|---|--|
| (K) Restricciones del punto de división (6,9,8) | $(C-1)(r-1) = (2-1)(2-1) = 1$ $X_8^{Alc} = X_9^{Alc}$ |
| (l) Restricciones del punto de división (4,12,13) | $(C-1)(r-1) = (2-1)(2-1) = 1$ $X_{12}^{H_2O} = X_{13}^{H_2O}$ |

RESULTADOS PEDIDOS

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|---|--|
| Flujos de cada componente en cada corriente en Kgmol/ s o en su defecto, en Kg /s. | N_j^i ó F_j^i , i: componente, j: corriente |
| Selectividad de ácido acético a acetaldehído | $S_{\text{acet/acetald}} = r_2 / (r_1 - r_2)$ ó $S_{\text{acet/acetald}} = N_3^{\text{acet}} / (N_3^{\text{acet}} - N_2^{\text{acet}})$ |
| Nuevo porcentaje de exceso de aire si se desea producir la misma cantidad de ácido acético pero empleando una corriente de aire enriquecido (50 % molar de O ₂ y 50 % molar de N ₂), obteniéndose una composición molar de N ₂ a la salida del reactor de 70 %. | Modificando los siguientes datos: $X_{11}^{O_2} = 0,5$; $X_{11}^{N_2} = 0,5$ $X_{10}^{N_2} = 0,7$; $X_{10}^{O_2} = 0,3$ Los valores de r_1 y r_2 se conservan. Determinar: $\% \text{exc}^{O_2} = (N_{11}^{O_2} - \text{CTR}^{O_2}) * 100 / \text{CTR}^{O_2}$ |

ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

| Unidad | R1 | S1 | S2 | M 1,2,9, 12 | D 6,9,8 | D 4,12,13 | Proceso | Global |
|-----------------------|--------------------|----|------------------|----------------------|------------------|------------------|---|------------------------|
| Variables del sistema | 13+2 | 11 | 8 | 11 | 6 | 6 | 34+2 | 13+2 |
| Balances L. I. | 7 | 5 | 4 | 4 | 2 | 2 | 24 | 7 |
| Flujos | 0 | 0 | 0 | 1 ^(j) | 0 | 0 | 1 ^(j) | 1 ^(j) |
| Composiciones | 1 ⁽ⁱ⁾ | 0 | 1 ^(g) | 0 | 0 | 1 ^(f) | 3 ^(f,g,i) | 3 ^(f,g,i) |
| Relaciones auxiliares | 2 ^(d,e) | 0 | 0 | 3 ^(a,b,c) | 1 ^(k) | 1 ^(l) | 6 ^(a,b,c,d,e,h) +2 ^(j,k) | 4 ^(a,b,c,h) |
| Grados de Libertad | 5 | 6 | 3 | 3 | 3 | 2 | 0 | 0 |



ESTRATEGIA PRELIMINAR DE RESOLUCIÓN

Inicialmente se comienza haciendo un balance global debido a que los grados de libertad correspondientes a este son iguales a cero, con este se obtienen las relaciones de reacción y las variables necesarias para luego realizar el balance en el reactor. A partir de este se obtiene las variables para hacer cero los grados de libertad del punto de Mezcla 1,2,9,12. Luego se realizan los balances en los puntos de división (ambos) y por último los correspondientes a los separadores S1 y S2.

TABLA DE RESULTADOS

| Sustancia | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|---------------|--------------|---------------|---------------|---------------|---------------|--------------|--------------|
| Alcohol | 46,05 | 59,61 | 22,76 | 0,00 | 22,76 | 22,76 | 0,00 |
| Oxígeno | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Nitrógeno | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Bacteria | 10,00 | 119,22 | 119,22 | 119,22 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Agua | 11,51 | 23,65 | 39,16 | 13,25 | 25,92 | 0,00 | 25,92 |
| Acetaldehído | 0,00 | 9,88 | 16,58 | 0,00 | 16,58 | 16,58 | 0,00 |
| Ácido acético | 0,00 | 0,00 | 38,87 | 0,00 | 38,87 | 0,00 | 38,87 |
| Total | 67,56 | 212,35 | 236,59 | 132,46 | 104,13 | 39,34 | 64,79 |

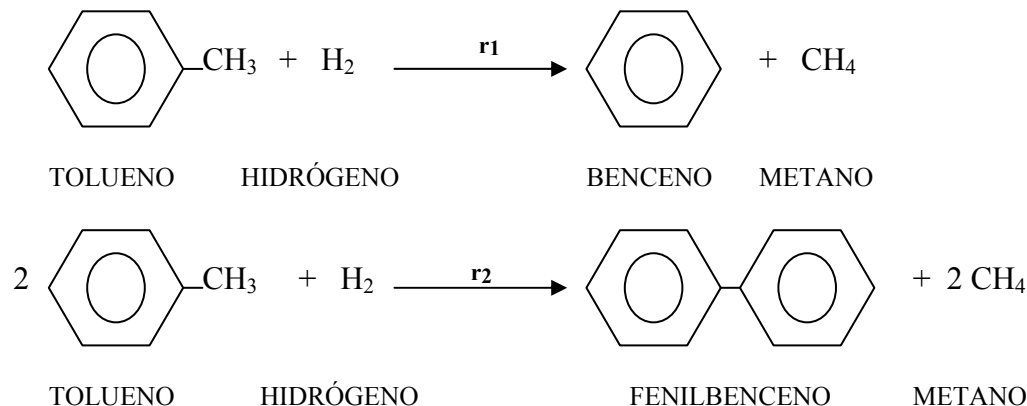
| Sustancia | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|---------------|--------------|--------------|---------------|---------------|---------------|--------------|
| Alcohol | 9,20 | 13,56 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Oxígeno | 0,00 | 0,00 | 47,77 | 60,80 | 0,00 | 0,00 |
| Nitrógeno | 0,00 | 0,00 | 228,72 | 228,72 | 0,00 | 0,00 |
| Bacteria | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 109,22 | 10,00 |
| Agua | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 12,14 | 1,11 |
| Acetaldehído | 6,70 | 9,88 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Ácido acético | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Total | 15,90 | 23,43 | 276,49 | 289,52 | 121,35 | 11,11 |

Selectividad de ácido acético a acetaldehído en el reactor = 4,25 %

Nuevo % de exceso de oxígeno = 26,7 %



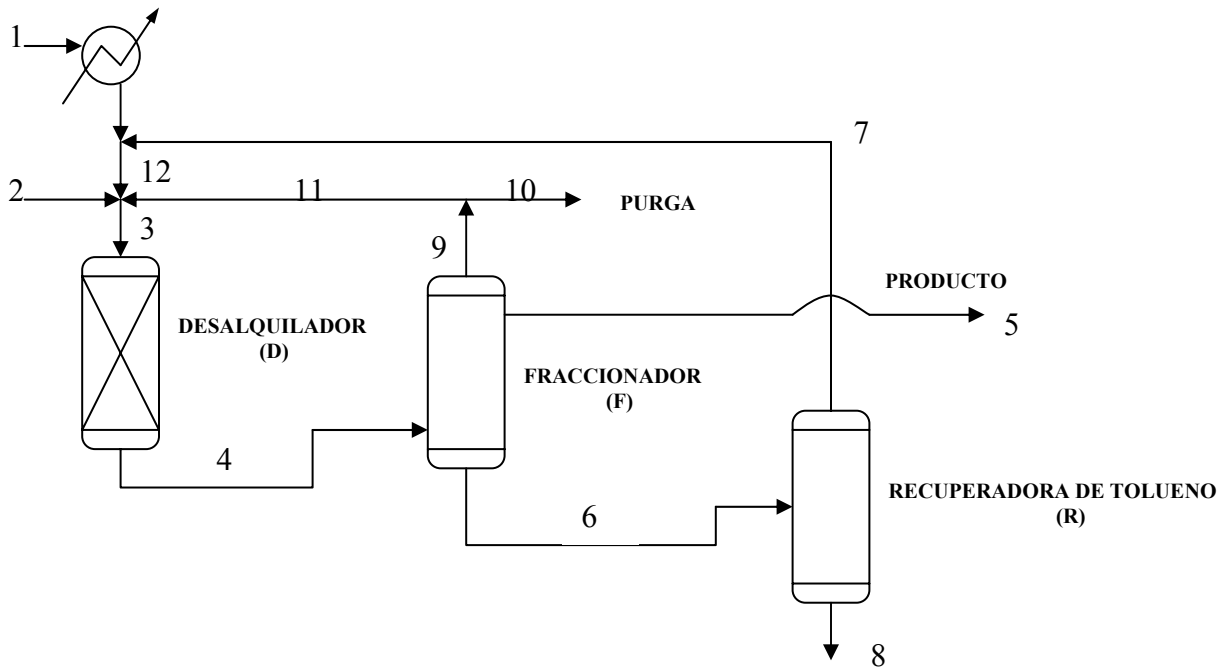
5. En un proceso de desalquilación de tolueno (C_7H_8) para producir benceno (C_6H_6) se obtienen 7814 Kg/h de una corriente de salida (5) con una composición del 99% en moles de C_6H_6 , siendo el resto C_7H_8 . En el desalquilador además de la transformación del tolueno en benceno ocurre una reacción secundaria en la cual el tolueno se transforma en fenilbenceno ($C_6H_5-C_6H_5$) como se indica a continuación:



El reactor se alimenta con tolueno, benceno, 400% de hidrógeno en exceso, y un 10% molar de CH_4 , las pérdidas de benceno en el fraccionador no deben superar el 5% molar. La concentración del fenilbenceno en el fondo de la torre recuperadora de tolueno es del 99.5% molar. La conversión fraccionaria en una etapa del tolueno es de un 0.7, y se producen 60 moles de C_6H_6 por cada 100 moles de C_7H_8 alimentados al desalquilador. Calcular la conversión global del tolueno, el rendimiento global en benceno, la selectividad del benceno respecto al fenilbenceno (moles producidos de producto deseado x 100/ moles producidos de producto no deseado) y completar la tabla de flujos.

Los resultados deben expresarse sobre la base de la producción dada (en masa o en moles).

| | | | | | | | | | | | | |
|----------------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| H_2 | X | | | | X | X | X | X | | | | X |
| C_7H_8 | | X | | | | | | | X | X | X | |
| C_6H_6 | X | X | | | | | | X | X | X | X | |
| $C_6H_5C_6H_5$ | X | X | X | | X | | X | | X | X | X | X |
| CH_4 | X | X | | | X | X | X | X | | | | X |



DATOS Y RELACIONES AUXILIARES

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|--|--|
| (a) Se obtienen 7814 Kg/h de una corriente de salida (5) | $F_5 = 7814 \text{ Kg/h}$ |
| (b) La composición de benceno en 5 es 99% mol | $X^{C_6H_6}_5 = 0,99$ |
| (c) La corriente 3 tiene un 400% de exceso de H ₂ | $\%exc^{H_2} = (N^{H_2}_3 - CTR^{H_2}) * 100 / CTR^{H_2} = 400$ |
| (d) La composición de metano en 3 es 10% mol | $X^{CH_4}_3 = 0,1$ |
| (e) Las pérdidas de benceno en el fraccionador no deben superar el 5% molar | $N^{C_6H_6}_6 = 0,05 N^{C_6H_6}_4$ ó $N^{C_6H_6}_5 = 0,95 N^{C_6H_6}_4$ |
| (f) La concentración del fenilbenceno en el fondo de la torre recuperadora de tolueno es del 99,5% molar | $X^{C_6H_5C_6H_5}_8 = 0,995$ |



| | |
|--|--|
| (g) La conversión fraccionaria en una etapa del tolueno en el desalquilador es 0,7 | $\text{Conv}^{C_7H_8} = (N^{C_7H_8}_3 - N^{C_7H_8}_4) / N^{C_7H_8}_3 = 0,7$ ó $\text{Conv}^{C_7H_8} = (r_1 + 2r_2) / N^{C_7H_8}_3 = 0,7$ |
| (h) Se producen 60 moles de C_6H_6 por cada 100 moles de C_7H_8 alimentados al desalquilador | $(N^{C_6H_6}_4 - N^{C_6H_6}_3) / N^{C_7H_8}_3 = 0,6$ ó $r_1 / N^{C_7H_8}_3 = 0,6$ |
| (i) Restricciones del punto de división | $(C-1)(r-1) = (2-1)(2-1) = 1$ $X_{10}^{CH_4} = X_{11}^{CH_4}$ |

RESULTADOS PEDIDOS

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|---|---|
| Flujos de cada componente en cada corriente | N^i_j ó F^i_j , i: componente, j: corriente |
| Conversión global del tolueno | $\% \text{Conv}^{C_7H_8} = (N^{C_7H_8}_1 - N^{C_7H_8}_5 - N^{C_7H_8}_8) * 100 / N^{C_7H_8}_1$ ó $\text{Conv}^{C_7H_8} = (r_1 + 2r_2) / N^{C_7H_8}_1$ |
| Rendimiento global en benceno | $\text{Rend}^{\text{benc}} = N^{\text{benc}}_5 / N^{\text{tolueno}}_1$ |
| Selectividad del benceno respecto al fenilbenceno | $S_{\text{benc}/\text{fenilbenceno}} = r_1 / r_2$ ó $S_{\text{benc}/\text{fenilbenceno}} = (N^{\text{benc}}_4 - N^{\text{benc}}_3) / N^{\text{fenilbenceno}}_4$ |

ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

| | M 1,7,12 | M 12,2,3,11 | D | F | R | Div 9,10,11 | Proceso | Global |
|------------------------------|-------------|------------------|----------------------|------------------|------------------|------------------|--|--------------------|
| Variables del sistema | 5 | 9 | 9+2 | 12 | 7 | 6 | 28+2 | 8+2 |
| Balances L. I. | 2 | 4 | 5 | 5 | 3 | 2 | 21 | 5 |
| Flujos | 0 | 0 | 0 | 1 ^(a) | 0 | 0 | 1 ^(a) | 1 ^(a) |
| Composiciones | 0 | 1 ^(d) | 1 ^(d) | 1 ^(b) | 1 ^(f) | 0 | 3 ^(b,d,f) | 2 ^(b,f) |
| Relaciones auxiliares | 0 | 0 | 3 ^(c,g,h) | 1 ^(e) | 0 | 1 ⁽ⁱ⁾ | 4 ^(c,e,g,h) +1 ⁽ⁱ⁾ | 0 |
| Grados de Libertad | 3 | 4 | 2 | 4 | 2 | 3 | 0 | 2 |



ESTRATEGIA PRELIMINAR DE RESOLUCIÓN

Se hacen balances combinados entre el fraccionador y el global con el fin de obtener las relaciones de reacción de cada una de las reacciones, con lo cual se puede realizar el balance completo en el desalquilador; posteriormente el balance completo en el fraccionador y luego en la recuperadora de tolueno. Sólo quedan los puntos de mezcla M1 y M2 y el punto de división que es posible resolverlos con los datos obtenidos anteriormente.

SOLUCIÓN

TODOS LOS RESULTADOS EN LA TABLA ESTÁN EXPRESADOS EN KMOL/H

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|---|--------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|------|--------|--------|--------|--------|
| H₂ | X | 473,60 | 823,85 | 716,75 | X | X | X | X | 716,75 | 366,50 | 350,25 | X |
| C₇H₈ | 116,38 | X | 164,77 | 49,43 | 1,00 | 48,43 | 48,39 | 0,04 | X | X | X | 164,77 |
| C₆H₆ | X | X | 2,98 | 101,84 | 98,86 | 2,98 | 2,98 | X | X | X | X | 2,98 |
| C₆H₅C₆H₅ | X | X | X | 8,24 | X | 8,24 | X | 8,24 | X | X | X | X |
| CH₄ | X | X | 110,18 | 225,52 | X | X | X | X | 225,52 | 115,34 | 110,18 | X |

Conversión global del tolueno: 99,1%

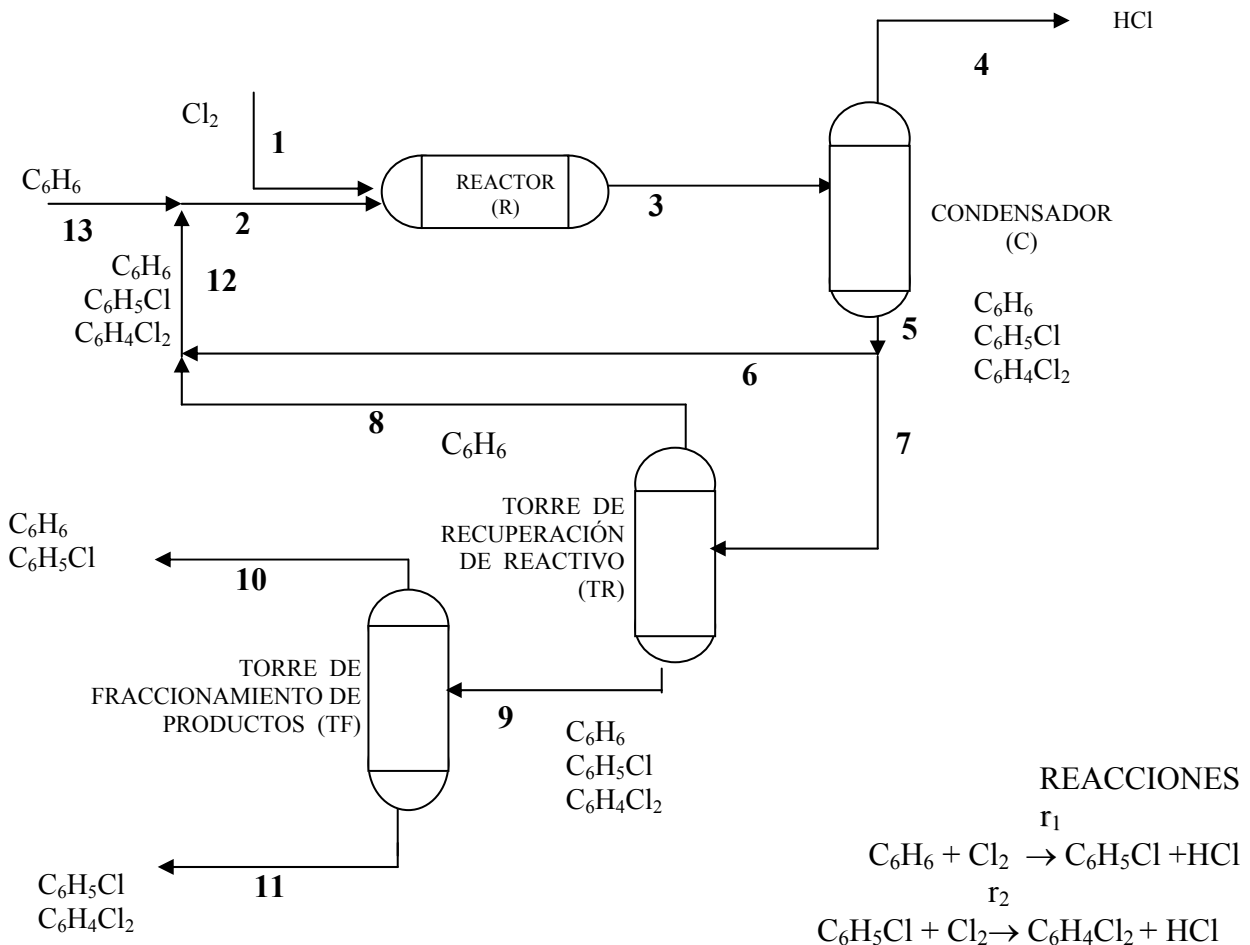
Rendimiento en benceno: 84,9%

Selectividad: 1200%



6. Se clora benceno (C_6H_6) para obtener clorobenceno (C_6H_5Cl), en un reactor con recirculación como se muestra en el esquema. La conversión en el reactor (por paso) se mantiene baja (20%) y se logra una selectividad en el mismo de 9 moles de C_6H_5Cl por cada mol de $C_6H_4Cl_2$ (diclorobenceno, subproducto). A la salida del reactor, un sistema de condensación permite separar todo el HCl producido en la corriente gaseosa. La mitad de la corriente líquida es enviada a un sistema de purificación, constituido por una torre de recuperación de reactivo y una torre de fraccionamiento de productos. La otra mitad de la salida del condensador es recirculada al reactor. El tope de la torre de recuperación de reactivo es benceno puro y debe diseñarse para que en el proceso no se pierda más del 9,1% del benceno alimentado. La torre de fraccionamiento debe recuperar en la corriente 10 el 90% del clorobenceno alimentado a la misma, mientras que el diclorobenceno debe salir por el fondo.

Para una alimentación fresca de 100 t/d de benceno, calcule el flujo másico (t/d) y composición másica de las corrientes de clorobenceno (10) y diclorobenceno (11). Llene una tabla con los flujos másicos de cada componente en cada corriente. Calcule la conversión global de benceno, el rendimiento fraccional a clorobenceno y el porcentaje de reactivo en exceso en el reactor y en el proceso.





DATOS Y RELACIONES AUXILIARES

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|---|--|
| (a) El % de conversión por paso en el reactor de C ₆ H ₆ es 80% | $\%Conv^{C_6H_6} = (N^{C_6H_6}_2 - N^{C_6H_6}_3) * 100 / N^{C_6H_6}_2 = 80$ ó $\%Conv^{C_6H_6} = r_1 / N^{C_6H_6}_2 = 0,80$ |
| (b) Se logra una selectividad de 9 moles de C ₆ H ₅ Cl por cada mol de C ₆ H ₄ Cl ₂ . | $S = (r_1 - r_2) / r_2 = 9$ ó $(N^{C_6H_5Cl}_3 - N^{C_6H_5Cl}_2) / (N^{C_6H_4Cl_2}_3 - N^{C_6H_4Cl_2}_2) = 9$ |
| (c) La mitad de la corriente líquida (salida del condensador) es enviada a un sistema de purificación y la otra mitad es recirculada al reactor | $N_6 = 1/2N_5$ ó $N_7 = 1/2N_5$ |
| (d) En el proceso no se debe perder más del 9,1% del benceno alimentado | $N^{C_6H_6}_{10} = 0,091 N^{C_6H_6}_{13}$ |
| (e) La torre de fraccionamiento debe recuperar en la corriente 10 el 90% del clorobenceno alimentado a la misma | $N^{C_6H_5Cl}_{10} = 0,9 N^{C_6H_5Cl}_9$ |
| (f) Para una alimentación fresca de 100 t/d de benceno | $F^{C_6H_6}_{13} = F_{13} = 100$ t/d |
| (g) Restricciones del punto de división | $(C-1)(r-1) = (3-1)(2-1) = 2$ $X_6^{C_6H_6} = X_7^{C_6H_6}$, $X_6^{C_6H_5Cl} = X_7^{C_6H_5Cl}$ |

RESULTADOS PEDIDOS

| EXPRESIÓN | ECUACIÓN |
|--|--|
| Flujo másico(t/d) de la corriente de clorobenceno (10) | $F_{10} = F_{10}^{C_6H_6} + F_{10}^{C_6H_5Cl}$ |
| Composición másica de la corriente de clorobenceno (10) | $W_{10}^{C_6H_6}$, $W_{10}^{C_6H_5Cl}$ |
| Flujo másico(t/d) de la corriente de diclorobenceno (11) . | $F_{11} = F_{11}^{C_6H_4Cl_2} + F_{11}^{C_6H_5Cl}$ |



| | |
|---|---|
| Composición másica de la corriente de diclorobenceno (11) | $W_{11}^{C_6H_5Cl_2}, W_{11}^{C_6H_5Cl}$ |
| Flujos másicos de cada componente en cada corriente | $F_j^i,$ i: componente, j: corriente |
| Conversión global de benceno | $\%Conv^{C_6H_6} = (N_{13}^{C_6H_6} - N_{10}^{C_6H_6}) * 100 / N_{13}^{C_6H_6}$ ó $Conv^{C_6H_6} = r_1 / N_{13}^{C_6H_6}$ |
| Rendimiento fraccional a clorobenceno | $Rend = (r_1 - r_2) / N_1^{Cl_2}$ |
| Porcentaje de reactivo en exceso en el reactor | $\%exc^{C_6H_6}_{reactor} = (N_2^{C_6H_6} - CTR^{C_6H_6}) * 100 / CTR^{C_6H_6}$ |
| Porcentaje de reactivo en exceso en el proceso. | $\%exc^{C_6H_6}_{proceso} = (N_{13}^{C_6H_6} - CTR^{C_6H_6}) * 100 / CTR^{C_6H_6}$ ó $\%exc^{Cl_2}_{proceso} = (N_1^{Cl_2} - CTR^{Cl_2}) * 100 / CTR^{Cl_2}$ |

ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

| Unidad | R | C | TR | TF | D5,6,7 | M6,8,12 | M13,2,12 | Proceso | Global |
|------------------------------|--------------------|---|----|------------------|------------------------------------|---------|------------------|--|------------------|
| Variables del sistema | 8+2 | 8 | 7 | 7 | 9 | 7 | 7 | 30+2 | 7+2 |
| Balances L. I. | 5 | 4 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 24 | 5 |
| Flujos | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 ^(f) | 1 ^(f) | 1 ^(f) |
| Composiciones | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Relaciones auxiliares | 2 ^(a,b) | 0 | 0 | 1 ^(e) | 1 ^(c) +2 ^(g) | 0 | 0 | 5 ^(a,b,c,d,e) +2 ^(g) | 1 ^(d) |
| Grados de Libertad | 3 | 4 | 4 | 3 | 3 | 4 | 3 | 0 | 2 |

ESTRATEGIA PRELIMINAR DE RESOLUCIÓN

Se establece una base de cálculo en el reactor para encontrar las relaciones de reacción de cada una de las reacciones, con esto se resuelve el balance en el reactor; posteriormente se realiza el balance en el condensador y en el punto de división ya que se conocen todas las incógnitas presentes. Luego se resuelve el balance global y con este el del punto de mezcla 13,2,12 y a partir de aquí el punto de mezcla 6,8,12 y la torre de recuperación, por último se puede resolver la torre fraccionadora. Al final se deben escalar los resultados para las 100 t/d de alimentación de benceno.



RESULTADOS

TABLA DE BALANCE DE MASA

| Sustancia | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|---|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------|---------------|---------------|
| Cl ₂ | 91,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| C ₆ H ₆ | 0,00 | 454,50 | 363,60 | 0,00 | 363,60 | 181,80 | 181,80 |
| C ₆ H ₅ Cl | 0,00 | 117,99 | 235,99 | 0,00 | 235,99 | 117,99 | 117,99 |
| C ₆ H ₄ Cl ₂ | 0,00 | 17,13 | 34,26 | 0,00 | 34,26 | 17,13 | 17,13 |
| HCl | 0,00 | 0,00 | 46,79 | 46,79 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Total | 91,02 | 589,63 | 680,64 | 46,79 | 633,85 | 316,93 | 316,93 |

| Sustancia | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|---|---------------|---------------|---------------|--------------|---------------|---------------|
| Cl ₂ | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| C ₆ H ₆ | 172,70 | 9,10 | 9,10 | 0,00 | 354,50 | 100,00 |
| C ₆ H ₅ Cl | 0,00 | 117,99 | 106,20 | 11,80 | 117,99 | 0,00 |
| C ₆ H ₄ Cl ₂ | 0,00 | 17,13 | 0,00 | 17,13 | 17,13 | 0,00 |
| HCl | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| Total | 172,70 | 144,23 | 115,30 | 28,93 | 489,63 | 100,00 |

TABLA DE COMPOSICIONES MÁSCAS

| Sustancia | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
|---|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| Cl ₂ | 1,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| C ₆ H ₆ | 0,000 | 0,771 | 0,534 | 0,000 | 0,574 | 0,574 | 0,574 |
| C ₆ H ₅ Cl | 0,000 | 0,200 | 0,347 | 0,000 | 0,372 | 0,372 | 0,372 |
| C ₆ H ₄ Cl ₂ | 0,000 | 0,029 | 0,050 | 0,000 | 0,054 | 0,054 | 0,054 |
| HCl | 0,000 | 0,000 | 0,069 | 1,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Total | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 |

| Sustancia | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
|---|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| Cl ₂ | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| C ₆ H ₆ | 1,000 | 0,063 | 0,079 | 0,000 | 0,724 | 1,000 |
| C ₆ H ₅ Cl | 0,000 | 0,818 | 0,921 | 0,408 | 0,241 | 0,000 |
| C ₆ H ₄ Cl ₂ | 0,000 | 0,119 | 0,000 | 0,592 | 0,035 | 0,000 |
| HCl | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Total | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 | 1,000 |

| | |
|---|---------------|
| Conversión del benceno en el proceso | 90,9% |
| Rendimiento fraccional a clorobenceno | 0,8 |
| Porcentaje de exceso de reactivo en el reactor | 354,6% |
| Porcentaje de exceso de reactivo en el proceso | 0% |



PARTE 3. PROBLEMAS PROPUESTOS

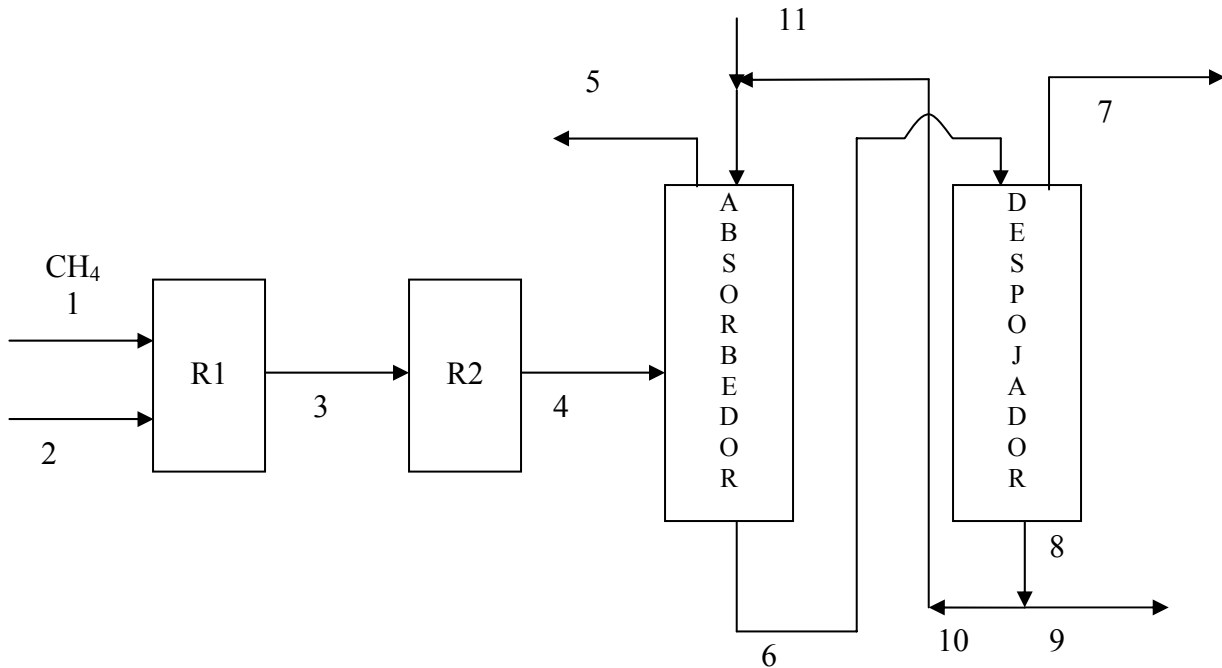
7. El esquema muestra el diagrama simplificado de una planta que permite obtener una corriente rica en H_2 a partir de metano. En el primer reactor el metano se quema utilizando 5 % de exceso de aire enriquecido al 50 % molar de O_2 , con respecto a la producción de CO (en este caso reacción principal). Bajo estas condiciones, el gas que sale de este reactor, sólo contiene CO, CO_2 , N_2 y H_2O (v). En el segundo reactor todo el CO reacciona con el vapor de agua para formar CO_2 y H_2 .

Para poder utilizar el hidrógeno para el proceso posterior, este debe ser purificado de CO_2 y H_2O utilizando un solvente apropiado, el cual se recircula a través del absorbedor y del despojador. En este sistema de purificación, por cada lbmol de CO_2 que entra al absorbedor (corriente 4), se alimentan al mismo 2 lbmol de una solución de solvente y agua, el cual contiene 60 % molar de agua.

El producto, corriente 5, contiene 1 % molar de CO_2 , todo el nitrógeno e hidrógeno y no contiene ni agua ni solvente. En el despojador se remueve todo el CO_2 , el cual sale por el tope y, para evitar la acumulación de agua al sistema, parte de la corriente que sale del despojador se purga.

- Calcule la composición de la corriente de producto (corriente 5).
- Calcule la composición de la corriente de purga (corriente 9).
- Calcule la cantidad de solvente puro (corriente 11) que debe reponerse por lbmol de H_2 producido (corriente 5).

DIAGRAMA DEL PROCESO





Solución:

a) $Y_5^{\text{CO}_2} = 0,01$
 $Y_5^{\text{N}_2} = 0,644$
 $Y_5^{\text{H}_2} = 0,346$

b) $X_9^{\text{SOLV.}} = 0,254$
 $X_9^{\text{H}_2\text{O}} = 0,746$

(Nota: Y corresponde con las fracciones molares del gas y X con las del líquido).

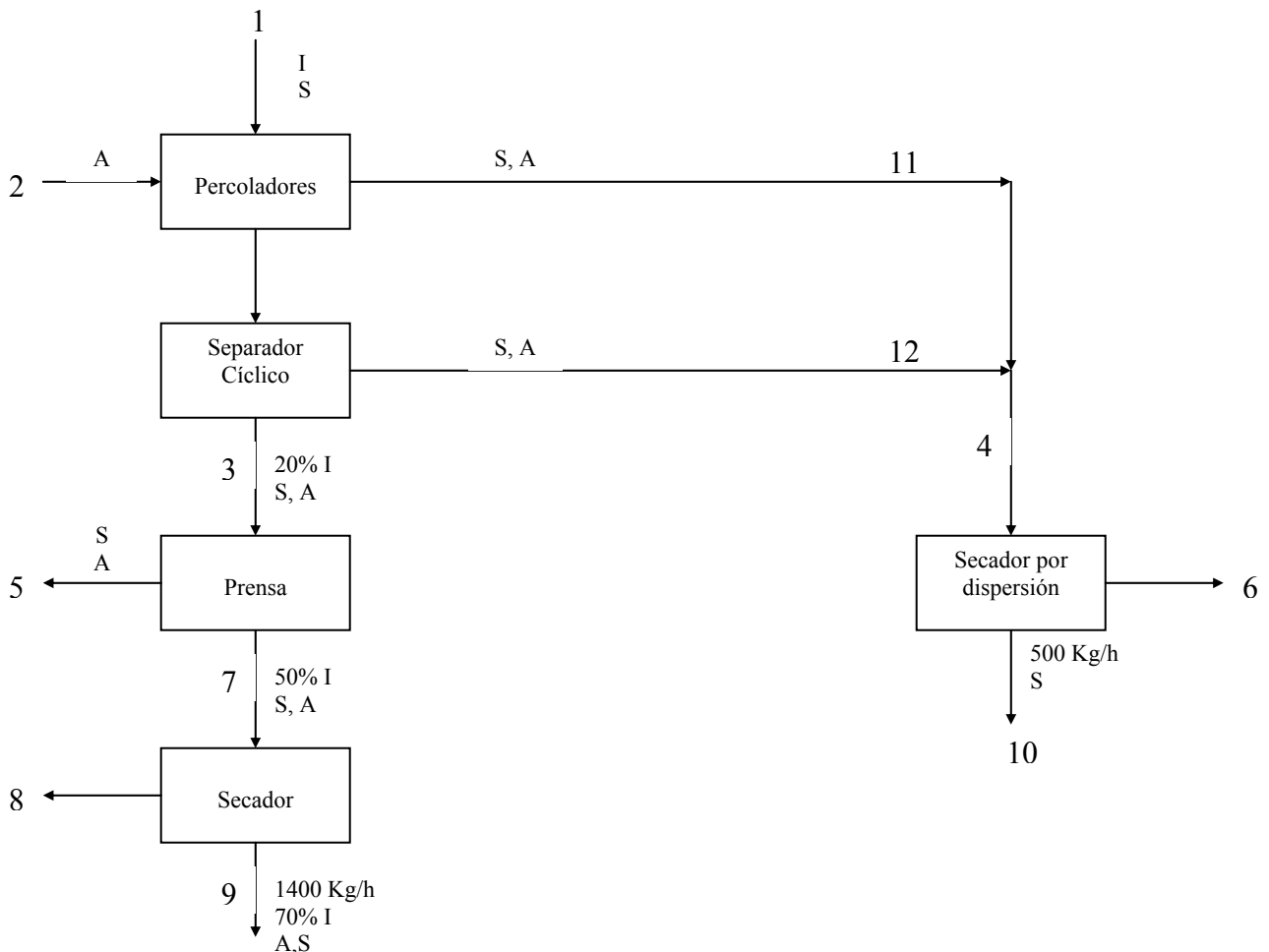
c) $N_{11}^{\text{SOLV.}} / N_5^{\text{H}_2} = 0,461 \text{ lbmol de sol / lbmol H}_2 \text{ producido.}$



8. Los granos de café contienen sustancias solubles en agua y otras que no lo son. Para producir café instantáneo, se disuelve la porción soluble en agua hirviendo (es decir, preparando café) en percoladores grandes, y se alimenta después con el café un secador en el que se evapora el agua, dejando café soluble como un polvo seco. La porción insoluble de los granos de café (el sedimento) pasa a través de varias operaciones de secado, y los sedimentos secos se queman o se utilizan como material de rehabilitación de tierra. Con la disolución extraída de los sedimentos en la primera etapa de secado, se alimenta un secador para juntarlo con el flujo de salida de los percoladores.

Los símbolos S e I representan los componentes solubles e insolubles de los granos de café respectivamente y A es el agua. La relación de flujo másico entre S y A en las corrientes 3,5,7,11 y 12 es 35/65.

- Calcular las velocidades de flujo (Kg/h) de los flujos 1 a 8.
- Si el líquido de salida de la prensa puede alimentar un secador sin afectar el sabor del producto, ¿en qué porcentaje se puede aumentar la velocidad de producción del café instantáneo?





SOLUCIÓN

- a) $F_1=2852 \text{ Kg/h}$
 $F_2=3476,57 \text{ Kg/h}$
 $F_3=4900 \text{ Kg/h}$
 $F_4=1428,57 \text{ Kg/h}$
 $F_5=2940 \text{ Kg/h}$
 $F_6=928,57 \text{ Kg/h}$
 $F_7=1960 \text{ Kg/h}$
 $F_8=560 \text{ Kg/h}$
- c) $\%Aumento=205,8\%$